

Matematické modelování znečištění ovzduší

Mathematical modeling of air pollution

Zadání bakalářské práce

Student:

Václav Ryška

Studijní program:

B2647 Informační a komunikační technologie

Studijní obor:

1103R031 Výpočetní matematika

Téma:

Matematické modelování znečištění ovzduší
Mathematical modeling of air pollution

Zásady pro vypracování:

1. Přehled matematických modelů pro modelování znečištění ovzduší
 2. Srovnání jednotlivých modelů pro různý typ aplikací
 3. Implementace vybraného modelu pro praktické nasazení v systému FLOREON+
-
1. Overview of mathematical models for air pollution modelling
 2. Comparison of models on different types of applications
 3. Implementation of selected model for practical use to system FLOREON+

Seznam doporučené odborné literatury:

Dle doporučení školitele

Formální náležitosti a rozsah bakalářské práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

Vedoucí bakalářské práce: **Doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.**

Datum zadání: 16.11.2012

Datum odevzdání: 07.05.2013



doc. RNDr. Jiří Bouchala, Ph.D.
vedoucí katedry



prof. RNDr. Václav Snášel, CSc.
děkan fakulty

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně. Uvedl jsem všechny literární prameny a publikace, ze kterých jsem čerpal.

V Ostravě 7. května 2013

.....
Václav Ryšav

Na tomto místě bych chtěl poděkovat Doc. Mgr. Vítu Vondrákovi, Ph.D. za podnětné připomínky, ochotu a poskytnuté rady. Dále bych rád poděkoval Ing. Tomášovi Brzobohatému, Ph.D. za pomoc a trpělivost při tvorbě praktické části. A v neposlední řadě děkuji rodině a přítelkyni, kteří mi byli po celou dobu tvorby této bakalářské práce oporou.

Abstrakt

Tato práce se zabývá matematickými modely, které se využívají pro modelování znečištění ovzduší. Cílem je analyzovat a následně porovnat přístupy k matematickému modelování znečištění ovzduší. Porovnává se analytický a numerický přístup z hlediska výsledků a výkonnosti na konkrétní úloze. Práce také srovnává výkonnosti paralelní a sekvenční implementace analytického modelu.

Klíčová slova: matematické modelování znečištění ovzduší, Suttonův model, difúzní rovnice, výpočetní dynamika tekutin, Navier-Stokesovy rovnice, OpenFOAM®

Abstract

This thesis deals with mathematical models which are used for mathematical modeling of air pollution. The objective is to analyze and then compare approaches to mathematical modeling of air pollution. Analytical and numerical approaches are compared in terms of results and performance on concrete task. There is also a performance comparison of parallel and sequential implementation of analytical model.

Keywords: mathematical modeling of air pollution, Sutton model, diffusion equation, computational fluid dynamics, Navier-Stokes equations, OpenFOAM®

Seznam použitých zkratk a symbolů

API	– Application programming interface
MVA	– Mezní vrstva atmosféry
CFD	– Computational fluid dynamics
PC	– Personal computer
GPS	– Global Positioning System
CAD	– Computer-aided design
GUI	– Graphical user interface
CPU	– Central Processing Unit
VŠB-TUO	– Vysoká škola Báňská - Technická univerzita Ostrava
MPI	– Message Passing Interface

Obsah

1 Úvod	4
1.1 Základní pojmy	5
1.2 Základní meteorologické souvislosti	6
2 Analytický model	7
2.1 Gaussovský model rozptylu kouřové vlečky	7
2.2 Suttonův model	9
2.3 SYMOS 97	12
2.4 Implementace a popis algoritmu	14
3 Numerický model	17
3.1 Výpočetní dynamika tekutin (CFD)	17
3.2 Navier-Stokesovy rovnice	19
3.3 OpenFOAM	20
4 Numerické experimenty	24
4.1 Porovnání analytického a numerického modelu	24
4.2 Porovnání sekvenční a paralelní implementace Suttonova modelu	27
5 Závěr	30
6 Reference	31
Přílohy	32
A Numerický model - obrázky a animace	33
B Analytický model - obrázky	34

Seznam obrázků

1	Gaussovský model rozptylu znečišťující příměsi - modelový tvar kouřové vlečky.	10
2	Gaussovský model rozptylu znečišťující příměsi - dolní odhad.	11
3	Gaussovský model rozptylu znečišťující příměsi - horní odhad.	11
4	Určení parametru ϑ pro obsažení terénu do výpočtu.	13
5	Výsledky úlohy vypočítané analytickým modelem	25
6	Výsledky úlohy vypočítané numerickým modelem	25
7	Výsledky úlohy vypočítané analytickým modelem - horizontální řez 20m nad zemí	26
8	Výsledky úlohy vypočítané numerickým modelem - řez 20m nad zemí . .	26
9	Časy výpočtů na síti se 4 000 000 uzlů - paralelizovaná síť	28
10	časy trvání výpočtů na síti se 4 000 000 uzlů - paralelizované zdroje	29

Seznam výpisů zdrojového kódu

1	deklarace třídy představujícího zdroj znečištění	14
2	metoda generující síť pro modelování	15
3	metoda, která počítá hodnoty znečištění v uzlech sítě	15
4	metoda, která počítá hodnoty znečištění v uzlech sítě	16
5	Zdrojový kód řešiče reprezentující rovnici (14)	21

1 Úvod

Popsat znečištění ovzduší a procesy probíhající v atmosféře je úloha velice náročná, a proto není možné v rámci jedné bakalářské práce zcela obsáhnout tuto oblast. Tato práce se proto omezuje na dva modely znečištění ovzduší, a to analytický a numerický model. Zatímco výstupem analytických modelů je globální funkce koncentrací znečištění nad celou modelovanou oblastí, numerické modely poskytují pouze aproximace této funkce v bodech diskretizace. Z tohoto důvodu jsou analytické modely více žádané, neboť poskytují řešení v kratším čase, avšak, aby je bylo možné řešit, musí být velice zjednodušené, což může vést k značným nepřesnostem. Naproti tomu, numerické modely mají mnohem větší časové nároky na řešení, díky tomu ale nabízejí větší přesnost výstupů než zjednodušené analytické modely. Náročnost těchto úloh spočívá v jejich rozsahu a ve snaze přiblížit se reálnému času, proto zde vzniká prostor pro vývoj nových algoritmů, které mohou využívat například efektivní paralelizaci. Výsledky tohoto typu úlohy lze využít zejména při ekologických haváriích (požáry, chemické havárie apod.) za předpokladu znalosti povětrnostních podmínek a tvaru reliéfu v místě havárie.

Jedním z cílů této práce je implementovat analytický model (sekvenčně i paralelně) a srovnat analytický a numerický model na vzorové úloze. Dále by se měly ukázat rozdíly v časové a výpočetní náročnosti modelů. Práce si klade za úkol také seznámit čtenáře s postupy využívanými při modelování znečištění ovzduší. Poslední přínos spočívá v možnosti případného budoucího praktického nasazení vybraného modelu v systému FLOREON+[10].

V oblasti matematického modelování látek kontaminujících ovzduší existují různé přístupy, jak získat přibližný obraz modelované skutečnosti. Kapitola 2 se zaměřuje na analytický model (v kombinaci se statistickými daty někdy také označovaný jako statistický model). Konkrétně popisuje Gaussovský model rozptylu kouřové vlečky a jeho praktické využití v podobě Suttonova modelu. Ten je základem metodiky SYMOS 97, o níž se kapitola také zmiňuje. Tato metodika je závaznou na území ČR podle nařízení vlády 597/2006 o sledování a vyhodnocování kvality ovzduší. Na konci kapitoly 2 následuje popis paralelní implementace Suttonova modelu za pomoci API OpenMP.

Kapitola 3 je věnována numerickému modelu, jenž je obsažen v open source softwarovém balíčku OpenFOAM. Oproti Suttonovu modelu nabízí dynamické modelování měnící se v čase, kdežto Suttonův model předpokládá ustálený stav v čase $t \rightarrow \infty$. Numerický model v OpenFOAMu také do výpočtu komplexněji zahrnuje terén a poskytuje lepší granularitu. Všechny tyto skutečnosti zapříčiňují, že numerický model je mnohem výpočetně i časově náročnější než model analytický.

První část kapitoly 4 popisuje numerické experimenty, kdy jsou na stejné úloze a vstupních datech porovnány výstupy Suttonova modelu s výstupy numerického modelu obsaženého v OpenFOAMu. Druhá část této kapitoly srovnává paralelní implementaci Suttonova modelu s využitím OpenMP se sekvenční implementací téhož modelu. Obě implementace jsou naprogramovány v C++.

1.1 Základní pojmy

Na tomto místě si zavedeme a objasníme některé pojmy, pomocí nichž bude dále vykládána problematika matematického modelování znečištění ovzduší. Pojmy jsem převzal z textu o ochraně ovzduší [3] a upravil s využitím informací z [5].

Vnější ovzduší - jde o okolní ovzduší konkrétně v troposféře.

Znečišťující látka - libovolná látka ve vnějším ovzduší, mající přímý (prakticky vždy škodlivý) vliv na život a zdraví živočichů, na životní prostředí a klimatický systém Země, případně na hmotný majetek.

Znečišťování ovzduší - vnášení jedné nebo více znečišťujících látek do ovzduší způsobené činností člověka; vyjadřuje se v jednotkách hmotnosti za jednotku času.

Emise - vnášení jedné nebo více znečišťujících látek do životního prostředí.

Úroveň znečištění ovzduší - hmotnostní koncentrace znečišťujících látek v ovzduší nebo jejich depozice z ovzduší na jednotku plochy zemského povrchu za jednotku času.

Imise - znečištění ovzduší vyjádřené hmotnostní koncentrací znečišťujících látek nebo stanovené skupiny znečišťujících látek.

Mezní vrstva atmosféry - spodní část troposféry, v níž se bezprostředně projevuje vliv zemského povrchu na pole meteorologických prvků. Její výška závisí především na členitosti a nerovnosti (obecně drsnosti) povrchu. Výška MVA je ovlivněna i dalšími meteorologickými parametry a pohybuje se mezi stovkami metrů až zhruba dvěma kilometry. Rozptyl znečišťujících látek (tím pádem i úroveň znečištění ovzduší) je z velké části určen procesy v MVA.

Přízemní vrstva atmosféry - spodní část MVA, na kterou působí tvar a drsnost zemského povrchu nejvýrazněji. Její výška se pohybuje v rozmezí několika desítek metrů od povrchu Země. Pro stanovení imisních limitů za účelem ochrany zdraví lidí je při posuzování kvality ovzduší podstatná právě tato vrstva, resp. tzv. „dýchací vrstva“, do výše 2 m nad zemským povrchem.

Rozptylové podmínky - podmínky pro změnu koncentrace znečišťujících látek ve vnějším ovzduší, určené intenzitou turbulentní difúze (uvažujeme mechanickou i termickou turbulenci). V ČR se posuzuje kvalita ovzduší pomocí stabilitní klasifikace rozptylových podmínek v atmosféře (resp. MVA) dle Bubníka a Koldovského. Ta rozeznává pět tříd stability (tj. typů rozptylových podmínek) závisících na vertikálním teplotním profilu. Podrobný popis jednotlivých tříd je možné nalézt v [1].

Atmosférická depozice - přenos látek z atmosféry k zemskému povrchu, vyjádřený jako hmotnost sledované látky na jednotku plochy za určitou časovou jednotku.

1.2 Základní meteorologické souvislosti

Existují tři hlavní parametry výrazně ovlivňující rozptyl znečišťujících příměsí v atmosféře, jak je uvedeno v [3].

Prvním z nich je **proudění** v atmosféře, které rozptyl v atmosféře zprostředkovává a uvnitř MVA nad zemským povrchem má převážně turbulentní charakter.¹ Horizontální složky (x,y) pole tohoto proudění jsou primárně určeny rozložením tlakového pole. Vertikální složka pole proudění vytváří turbulenci a je iniciována (mimo tření způsobeného drsností zemského povrchu) vertikálními proudy v tlakových útvarech. Pole proudění v MVA také vymezuje trajektorie unášení částic znečišťujících příměsí.

Existují dvě základní složky turbulence **termická** turbulence (konvekce) a **mechanická** turbulence. Původ termické turbulence může mít dvě příčiny. Vzniká buď v důsledku faktu, že atmosféra je horizontálně teplotně nehomogenní, nebo se projevuje jako vertikální cirkulace v oblasti tlakových výší a níží. Mechanická turbulence vzniká jako následek tření proudícího vzduchu o povrch Země, resp. při obtékání ortografických překážek a nerovností.

Proudění vzduchu může intenzitu rozptylu znečišťujících příměsí ovlivňovat i sekundárně, když nastane jev známý v meteorologii pod názvem inverze, kdy se relativně teplý vzduch prouděním přemístí nad chladný zemský vzduch, čímž dojde k výraznému zhoršení rozptylových podmínek a stabilita atmosféry vzroste.

Právě **stabilita** atmosféry je druhým parametrem, jenž výrazně ovlivňuje rozptyl znečišťujících látek v atmosféře (resp. MVA) a samotná inverze je nejméně příznivou situací pro rozptyl znečišťujících příměsí.

Dalším parametrem působícím na rozptyl znečištění je již dříve zmíněný **tlak**. Konkrétně pak tlaková pole cyklóny a anticyklóny, které ovlivňují trajektorie proudnic především ve vertikálním směru.

¹Turbulentním prouděním rozumíme takové proudění, u kterého se proudnice (trajektorie) jednotlivých částic vzájemně promíchávají. Oproti tomu u tzv. laminárního proudění jsou proudnice jednotlivých částic navzájem rovnoběžné.

2 Analytický model

Získání analytického řešení úlohy (a z něj plynoucího modelu) mnohdy bývá náročné až nemožné, proto je často třeba poněkud zidealizovat podmínky (tj. například zanedbat některé méně podstatné skutečnosti eventuálně zjednodušit jisté závislosti), abychom analytický model získali. Důsledkem tohoto zjednodušení může být i skutečnost, že z praktického hlediska bude výhodnější použít model numerický, který v daném případě poskytne realističtější výsledky.

Následující dvě podkapitoly popisují Gaussovský model rozptylu kouřové vlečky, jak je detailněji popsáno v [3]. Třetí podkapitola, která je inspirována [1] a [4], ukazuje jeho názorné využití v praktických aplikacích metodiky SYMOS 97.

2.1 Gaussovský model rozptylu kouřové vlečky

Gaussovský model rozptylu znečišťujících příměsí v atmosféře vychází z analytického řešení konvekčně-difúzní rovnice

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c) - \nabla \cdot (\mathbf{u}c) + R \quad (1)$$

kde c je v našem případě skalární funkce popisující koncentrace znečištění, t je čas, D je difúzní koeficient, \mathbf{u} znamená rychlost částic a R vyjadřuje zdrojovou funkci emitující znečištění. Samostatná konvekce² je popsána prvním členem na pravé straně. Samostatnou difúzi³ popisuje druhý člen na pravé straně. Výchozím principem pro získání řešení je zanedbání advekčního členu

$$\nabla \cdot (D \nabla c). \quad (2)$$

Dostaneme obecně platnou Navier-Stokesovu rovnici pro zachování střední koncentrace pasivní příměsí v aproximaci pro nestlačitelnou tekutinu

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x^{(c)} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y^{(c)} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z^{(c)} \frac{\partial c}{\partial z} \right). \quad (3)$$

Z ní postupnými úpravami (pro podrobnější popis viz [3]) lze odvodit vztah pro rozložení koncentrace pasivní příměsí ve směru proudění od kontinuálního zdroje, který má po zanedbání malých členů pro teoreticky ustálený stav v libovolné vzdálenosti od kontinuálního zdroje (limita pro $t \rightarrow \infty$) tvar:

$$c^*(x, y, z) \cong \frac{Q}{4\pi K^{(c)}_x} \cdot e^{\left[-\frac{\bar{u}_x (y^2 + z^2)}{4K^{(c)}_x} \right]} \quad (4)$$

²Děj, kdy je látka unášena spolu s proudící tekutinou (v našem případě vzduch unáší částice znečištění).

³Děj, kdy dochází k přenosu látky z míst s vyšší koncentrací do míst s nižší koncentrací.

c^* vyjadřuje rovnovážnou koncentraci v $t \rightarrow \infty$.

Takto formulovaný rozptylový model bude uvnitř pole proudění v MVA počítat výsledky blížíící se realitě pouze lokálně, což principiálně znamená do vzdálenosti od zdroje, kdy lze ještě zanedbat odklon trajektorií advekčního přesunu částic pro pasivní příměsi, který vzniká z důvodu zakřivení proudnic. Tato vzdálenost se mění velice variabilně v závislosti na členitosti zemského povrchu. Důvodem pro tento fakt je skutečnost, že advekční přenos, zahrnutý ve výpočtu jako jednorozměrný posun, nemá sám o sobě žádnou vazbu na složité turbulentní proudění v MVA.

Pokud je rovnovážné působení kontinuálního zdroje (v $t \rightarrow \infty$) zahrnuto již ve výchozí rovnici pro difúzi:

$$\bar{u}_x \frac{\partial c^*}{\partial x} = K_x^{(c)} \frac{\partial^2 c^*}{\partial x^2} + K_y^{(c)} \frac{\partial^2 c^*}{\partial y^2} + K_z^{(c)} \frac{\partial^2 c^*}{\partial z^2} \quad (5)$$

lze k modelovému řešení typu (4) dospět i jiným způsobem.

V tomto případě je vedle anizotropie ($K_x^{(c)} \neq K_y^{(c)} \neq K_z^{(c)}$) primárně zohledněn také advekční přenos. Jelikož je ale opět zohledněn pouze jako jednorozměrný s konstantní rychlostí proudění ve směru osy x ($\bar{u}_x = konst.$), pak výše uvedené souvislosti platí i při tomto odvození.

Trojrozměrné pole koncentrace znečišťující příměsi v okolí kontinuálního zdroje, které odpovídá kouřové vlečce, je popsáno rovnicí (4). V rámci této anizotropické konstrukce má smysl uvažovat konstantu turbulentní difúze $K^{(c)}$ jako dvoudimenzionální, nabývající různé hodnoty v dimenzích charakterizujících profil vlečky (tzn. ve směrech os x a y). Pak můžeme psát

$$c^*(x, y, z) \cong \frac{Q}{4\pi x \sqrt{K_y^{(c)} K_z^{(c)}}} \cdot e^{\left(-\frac{\bar{u}_x y^2}{4K_y^{(c)} x}\right)} \cdot e^{\left(-\frac{\bar{u}_x z^2}{4K_z^{(c)} x}\right)} \quad (6)$$

Vzhledem k faktu, že uvažujeme konstantní rychlost (i směr) transportního proudění (jež reprezentuje advekční posun ve směru osy x) \bar{u}_x , můžeme pro takto konstruovaný popis kouřové vlečky zavést obecné rozptylové parametry

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{2K_y^{(c)} x}{\bar{u}_x}}, \sigma_z = \sqrt{\frac{2K_z^{(c)} x}{\bar{u}_x}}, \quad (7)$$

kteří mají ve výsledném vztahu

$$c^*(x, y, z) \cong \frac{Q}{2\pi \bar{u}_x \sigma_y \sigma_z} \cdot e^{\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)} \cdot e^{\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)} \quad (8)$$

význam směrodatných odchylek v Gaussově rozložení.

2.2 Suttonův model

Modelovému řešení difúzní rovnice (8), získanému v předchozí kapitole, odpovídá Suttonův, resp. Gaussovský model, jenž se pro výpočet rozptylu znečišťujících příměsí prakticky využívá.

$$c^*(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi \sigma_y \sigma_z \bar{u}} \cdot e^{\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)} \cdot \left[e^{\left(-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)} + e^{\left(-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right)} \right] \quad (9)$$

kde

Q - hmotnostní tok znečišťující látky emitované kontinuálním zdrojem [$10^{-3}g.s^{-1}$]

\bar{u} - zprůměrovaná rychlost proudění (advekční složka proudění) v ose x [$m.s^{-1}$]

σ_y, σ_z - příčné rozptylové parametry charakterizující turbulentní difúzi. Ze statistického hlediska jde o směrodatné odchylky určující Gaussovu křivku ve směrech os y a z v profilu vlečky.⁴ [m]

y - kolmá vzdálenost referenčního bodu (= bodu, ve kterém je počítána koncentrace) od osy vlečky; y se liší od nuly (přesněji je vyšší než nula), pokud referenční bod neleží na ose x (když se směrový vektor zdroj-referenční bod liší od zadaného směru proudění [m])

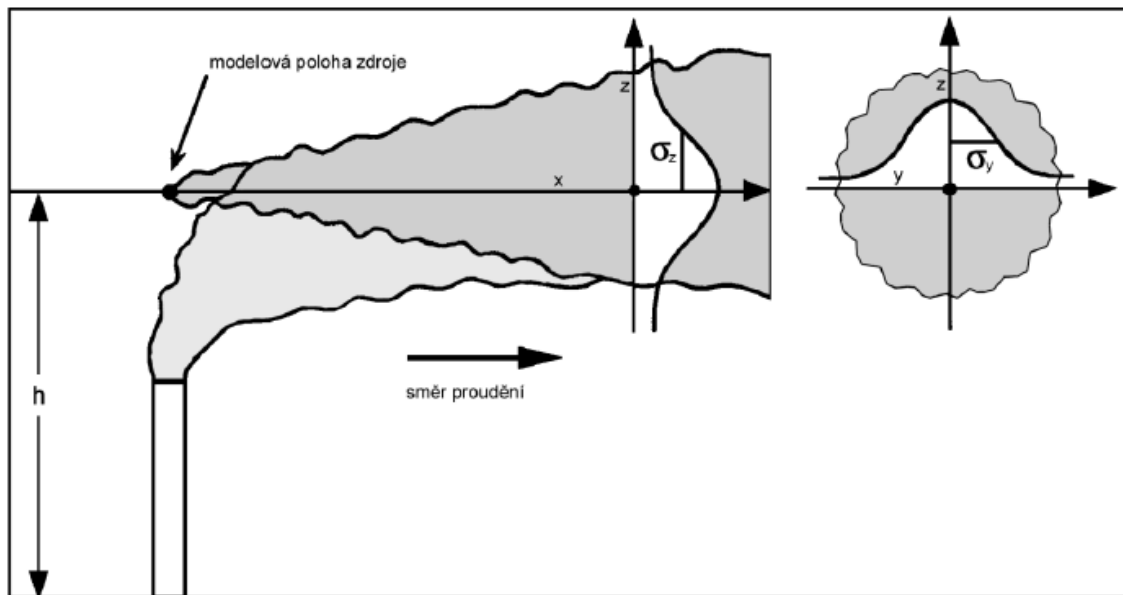
z - výškový rozdíl mezi polohou referenčního bodu a výškou v místě zdroje (obvykle nadmořská výška paty komína) [m]

h - efektivní výška zdroje (= stavební výška komína + tepelný vznos vlečky) [m]

x - délka osy vlečky (vzdálenost zdroje a kolmého průmětu referenčního bodu do osy x) [m]

Koncentrace znečišťující příměsí se udává v $10^{-3}g.m^{-3}$. Exponenciální členy jsou bezrozměrné a charakterizují stranový rozptyl kouřové vlečky, jejíž tvar je znázorněn na obrázku 1 převzatém z [3].

⁴Laicky řečeno tyto parametry určují, jak moc se vlečka rozpíná do stran a na výšku

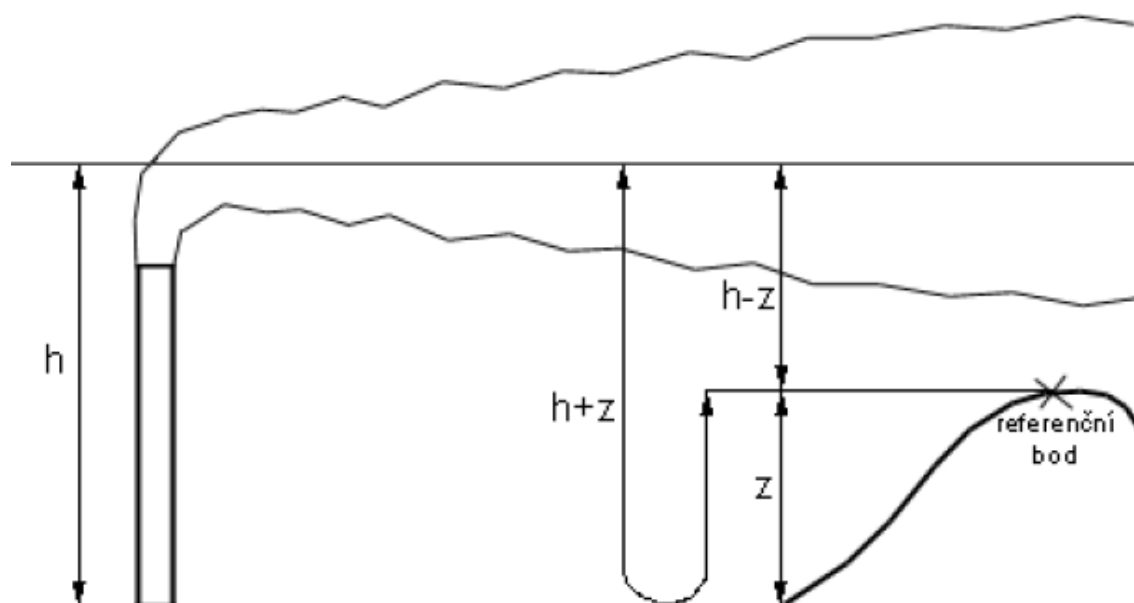


Obrázek 1: Gaussovský model rozptylu znečišťující příměsi - modelový tvar kouřové vlečky.

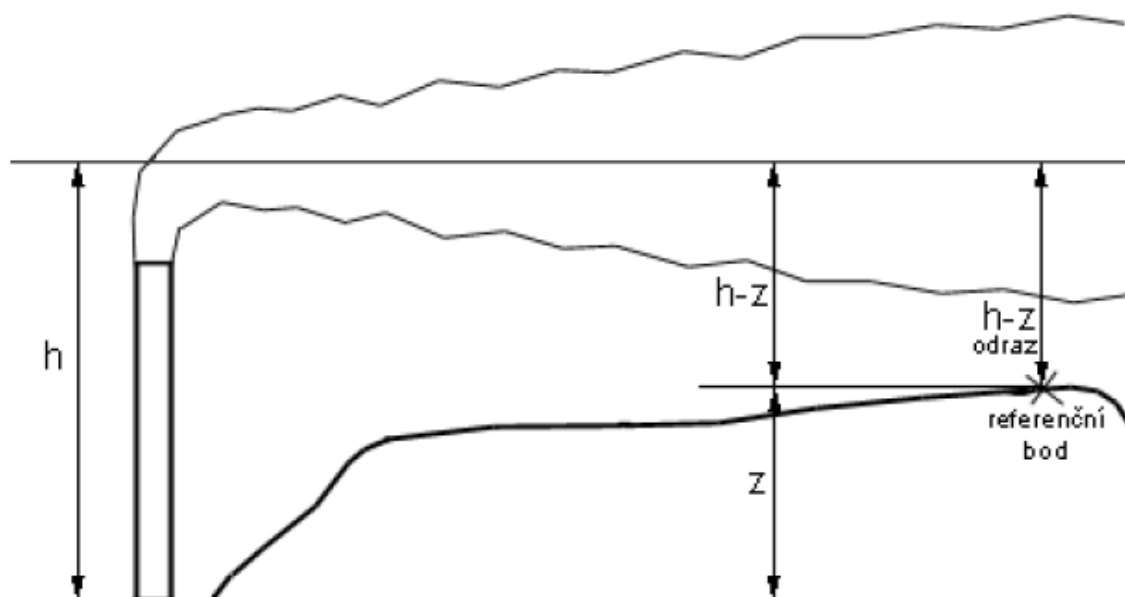
Uvedený vzorec (9) znázorňuje tzv. dolní odhad (viz obr.2 převzatý z [3]) koncentrace znečišťujících příměsí. Poslední člen na pravé straně $e^{\left(-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right)}$ vyjadřuje vertikální odraz rozptylující se plynné škodliviny od zemského povrchu. Vzorec počítá s odrazem od paty komína, tj. výraz $z + h$ reprezentuje celkovou z-ovou složku dráhy odražené částice znečišťující příměsí. Tento předpoklad funguje pro rovinatý terén a pro referenční bod na „osamělém kopci“ ve větší vzdálenosti od zdroje.

Pokud nastane případ, kdy se úroveň okolního terénu zvedá již v blízkosti zdroje, použijeme tzv. horní odhad (viz obr.3 převzatý z [3]), kdy se počítá s odrazem od úrovně terénu v místě referenčního bodu viz vzorec (10).

$$\bar{c}^*(x, y, z) = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z \bar{u}} \cdot e^{\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)} \cdot e^{\left(-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)} \quad (10)$$



Obrázek 2: Gaussovský model rozptylu znečišťující příměsi - dolní odhad.



Obrázek 3: Gaussovský model rozptylu znečišťující příměsi - horní odhad.

2.3 SYMOS 97

Metodika SYMOS 97 se v České republice používá roku 1998 jako závazná metoda pro výpočet rozptylu znečišťujících látek. Tato metoda modelování se taktéž využívá ke zpřesnění imisních map, které se primárně vytvářejí z údajů získaných ze sítě monitorovacích stanic (referenčních bodů). Prakticky tento mechanismus funguje tak, že se provede modelový výpočet zahrnující veškeré zdroje, u nichž se předpokládá, že ovlivňují ovzduší nad oblastí, kde se nenacházejí monitorovací stanice. Získané výsledky se zanesou spolu s naměřenými hodnotami do mapy, což vyústí v relativně přesnější výstupy než prosté interpolování naměřených hodnot.

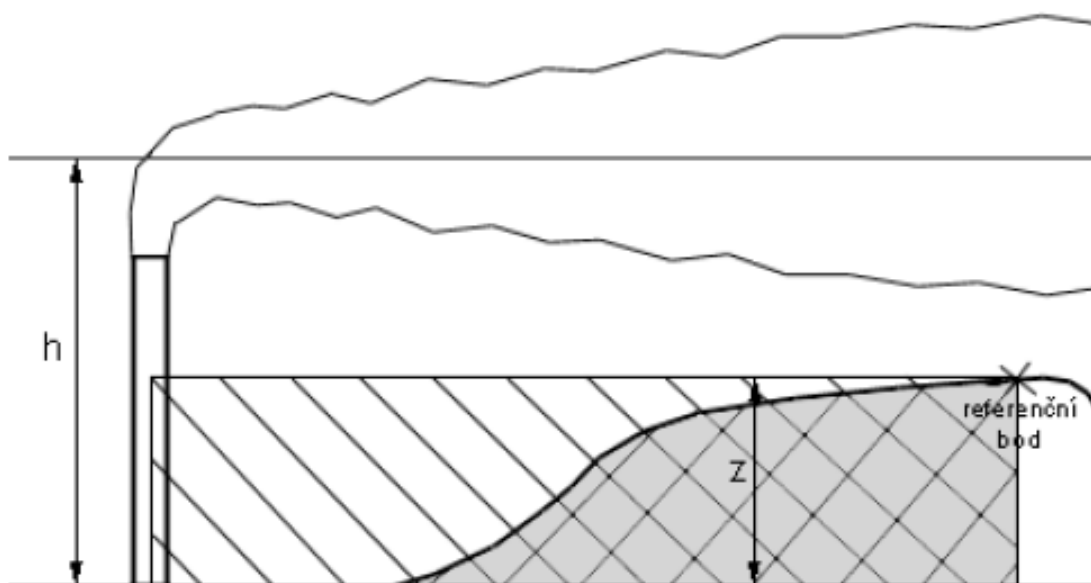
Základem pro metodiku SYMOS 97 je Gaussovský model rozptylu kouřové vlečky popisovaný v podkapitolách 2.1 a 2.2. SYMOS 97 rozšiřuje Gaussovský model rozptylu kouřové vlečky o dodatečné parametrizace, které slouží pro věrohodnější popis různých variant reálných rozptylových situací. Rozptylové parametry σ_y , σ_z jsou zde odvozovány na základě stabilitní klasifikace atmosféry podle Bubníka a Koldovského (viz dále v této kapitole).

Vzorec udávající imisní koncentraci znečišťující příměsi v okolí bodového zdroje (ve směru unášejícího proudění o střední rychlosti u) má tvar:

$$c = \frac{M_E}{2\pi \sigma_y \sigma_z u + V_s} \cdot e^{\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)} \cdot e^{\left(-k_u \frac{\chi_L}{u}\right)} \cdot K_h \cdot \left[(1 + \vartheta) \cdot e^{\left(\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)} + (1 - \vartheta) \cdot e^{\left(\frac{(|z|+h)^2}{2\sigma_z^2}\right)} \right] \quad (11)$$

Symbolsy, nesouvisející s dodatečnou parametrizací, mají stejný význam jako u obecného Gaussovského modelu, diskutovaného v podkapitolách 2.1 a 2.2, s výjimkou hmotnostního toku znečišťující látky, emitované kontinuálním zdrojem, který je zde (ve shodě s metodikou SYMOS 97) označován rozdílně jako $M_E [mg \cdot s^{-1}]$. V_s vyjadřuje objem spalin odcházející komínem přepočtený na normální podmínky (viz [1] kapitola 2.1.1, bod 6) $[N \cdot m^3 \cdot s^{-1}]$. χ_L určuje vzdálenost referenčního (uzlového) bodu od zdroje ve směru větru [m].

Koeficient ϑ získáme jako poměr plochy, kterou ve vertikálním řezu na spojnici mezi zdrojem a referenčním bodem zabírá terén (na obr. 4 převzatém z [3] dvojité vyšrafovaná oblast) k ploše obdélníka určeného vzdáleností od zdroje k referenčnímu bodu a rozdílem jejich nadmořských výšek (na obr. 4 jednoduše a dvojité vyšrafovaná oblast). Tento koeficient v sobě zahrnuje jak dolní tak horní odhad diskutované v podkapitole 2.2 ($\vartheta = 0 \rightarrow$ dolní odhad, $\vartheta = 1 \rightarrow$ horní odhad). Všechny výškové terénní extrémny, přesahující zmíněný obdélník, jsou zanedbány („seříznuty“), takže ϑ nabývá hodnot od 0 do 1 (mezi dolním a horním odhadem).



Obrázek 4: Určení parametru ϑ pro obsazení terénu do výpočtu.

V případě zvlněného terénu počítá SYMOS 97 se skutečností, že vertikální vychýlení osy kouřové vlečky po přechodu vyššího kopce je nevratné.

Dalším dodatečným parametrem je k_u , jenž reflektuje chemickou transformaci a atmosférickou depozici škodlivin při jejich přenosu od vzdálenějších zdrojů.

Parametr K_h zohledňuje možnost výskytu inverzí tím, že snižuje vliv nízkých zdrojů na ovzduší v horských oblastech. Tento faktor má na vypočtené hodnoty imisních charakteristik podstatný vliv zejména v případech, kdy referenční bod leží výrazně výše než je efektivní výška zdroje.

Metodika SYMOS 97 nabízí pochopitelně komplexnější přístup k modelování skutečnosti. Umí zpracovat příspěvky znečištění i z plošných (např. shluk rodinných domů) či liniových (dopravní komunikace) zdrojů. Dále tato metodika rozlišuje, zda je znečišťující látka pevného nebo plynného charakteru. Obecně SYMOS 97 umožňuje pro každý referenční bod (v případě, že jsou dostupná potřebná data) výpočet těchto základních charakteristik:

- maximální možné krátkodobé hodnoty koncentrací znečišťujících látek, které se mohou vyskytnout ve všech třídách rychlosti větru a stability ovzduší,
- průměrné dlouhodobé koncentrace,

- doba trvání koncentrací převyšujících určité předem zadané hodnoty (např. imisní limity).

Použitá metoda Gaussovského rozptylu kouřové vlečky sama o sobě neumožňuje stanovení koncentrací znečišťujících látek v ovzduší za extrémně nepříznivých podmínek při bezvětří a inverzích. Přitom tyto podmínky nastávají často zejména v údolích, trvají řadu hodin nebo i dní a bývají příčinou kalamitních situací v rámci znečištění ovzduší. Podrobnější popis, jak SYMOS 97 modeluje znečištění za těchto rozptylových podmínek, lze nalézt v [1].

2.4 Implementace a popis algoritmu

Suttonův model jsem implementoval v jazyce C++. Tuto implementaci jsem posléze pro zrychlení výpočtu paralelizoval pomocí API OpenMP, jelikož se zvyšujícím se počtem zdrojů a rostoucí velikostí výpočetní sítě se úloha stává výpočetně náročnější. OpenMP jsem zvolil proto, že umožňuje sekvenční kód efektivně paralelizovat prostřednictvím minimálních zásahů do něj. Řešení se skládá z následujících kroků

- vytvoření zdrojů (souřadnice zdroje, množství látky emitované zdrojem za čas)
- vytvoření sítě o zadaných rozměrech a hustotě, ve které se bude modelovat
- výpočet koncentrace znečištění ovzduší v každém bodě sítě pro všechny zdroje

Výpočet lze efektivně paralelizovat především na dvou místech. Jednak při výpočtu znečištění pro jednotlivé zdroje, takže každý zdroj může být počítán v jiném vlákne. Dále pak lze paralelizovat výpočet v síti (tzn. že koncentrace znečištění v různých uzlech sítě budou počítány různými vlákny, jelikož výpočet znečištění v jednom uzlu sítě nijak neovlivňuje výpočet znečištění v jiném uzlu).

V prvním kroku vytvoříme zdroje. Každý zdroj obsahuje souřadnice v síti a množství znečištění, které vypouští do ovzduší.

```

1  class SourceCoordinates
2  {
3  public:
4      SourceCoordinates();
5      SourceCoordinates(int x, int y, int z, double Q);
6      ~SourceCoordinates();
7      int X;
8      int Y;
9      int Z;
10     double Q;
11 };

```

Výpis 1: deklarace třídy představujícího zdroj znečištění

Ve výpisu 1 vidíme deklaraci třídy, která představuje zdroj znečištění. Na řádcích 4 až 6 jsou konstruktory a destruktory. Dále pak třída obsahuje deklaraci členských proměnných pro reprezentaci souřadnic a množství znečištění emitovaného zdrojem.

Veškeré výpočty a generování sítě a ostatních částí nutných pro výpočty zastřešuje třída Creator. Dalším krokem algoritmu je vytvoření sítě o zadané velikosti. Konstruktory třídy Creator se předávají 3 rozměry N_x N_y N_z (ve směru jednotlivých os). Souřadnice jsou v celé síti kladné (bod [0 0 0] se nachází v rohu sítě). Síť je reprezentována dvourozměrným polem `CoordinatesMatrix[N][3]` celých čísel o rozměrech $N * 3$, kde N je počet uzlů v síti a 3 jsou souřadnice každého uzlu.

```

1 void Creator::generateCoordinates()
2 {
3     int counter = 0;
4     for (int z = 0; z < Nz; z++)
5     {
6         for (int y = 0; y < Ny; y++)
7         {
8             for (int x = 0; x < Nx; x++)
9             {
10                 CoordinatesMatrix[counter][0] = x;
11                 CoordinatesMatrix[counter][1] = y;
12                 CoordinatesMatrix[counter][2] = z;
13                 counter++;
14             }
15         }
16     }
17 }
```

Výpis 2: metoda generující síť pro modelování

Výpis 2 ukazuje zdrojový kód metody `generateCoordinates()`, která zajišťuje vygenerování sítě pro modelování tak, jak je popsána výše.

V následujícím kroku algoritmu se pak podle vzorce (9) v každém uzlu sítě z jeho souřadnic spočítá koncentrace pro každý zdroj.

```

1 #pragma omp parallel for
2 for(int i = 0; i < N; i++)
3 {
4     countValuesParallel(u_x, s[i]);
5 }
```

Výpis 3: metoda, která počítá hodnoty znečištění v uzlech sítě

Konkrétně se pro všechny (N) zdroje z pole zdrojů `SourceCoordinates s[]` vypočítá jejich příspěvek znečištění v každém bodě sítě tak, že se zavolá metoda `countValuesParallel(double u_x, const SourceCoordinates &source)` (viz výpis 3). Direktiva `#pragma omp parallel for` zajišťuje paralelní provádění cyklu (tzn. že příspěvek různých zdrojů budou počítat různá vlákna).

```

1 void Creator::countValuesParallel(double u_x, const SourceCoordinates &source)
2 {
3     #pragma omp parallel for
4     for (int i = 0; i < NODE_COUNT; i++)
5     {
6         double hodnota = 0.0;
7         int x = CoordinatesMatrix[i][0] - source.X;
8         int y = abs(CoordinatesMatrix[i][1] - source.Y);
9         int z = CoordinatesMatrix[i][2];
10        if (x > 0)
11        {
12            hodnota = concentration(source.Q, x, y, z, source.Z, u_x) * 1000;
13        }
14        if (hodnota > 1.0)
15        {
16            Values[i] += hodnota;
17        }
18    }
19 }

```

Výpis 4: metoda, která počítá hodnoty znečištění v uzlech sítě

Metoda `countValuesParallel(double u_x, const SourceCoordinates &source)` počítá příspěvek zdroje `source` ve všech (`NODE_COUNT`) uzlech sítě. Výpis 4 obsahuje její zdrojový kód. Metoda přebírá jako vstupní parametry rychlost větru v síti a zdroj, jehož příspěvek počítá. Řádky 7 až 9 zajišťují přepočet souřadnice vzhledem ke zdroji pro účely výpočtu. Příspěvek zdroje je smysluplný jenom po směru větru (v případě Suttonova modelu ve směru osy x). Tato skutečnost je implementována na řádcích 10-13 výpisu. Dále je nastaven filtr pro malé hodnoty, aby výstup neobsahoval zanedbatelné hodnoty, které znepřehledňují následnou vizualizaci. Hodnoty v jednotlivých uzlech sítě jsou vypočteny pomocí metody `concentration(double Q, int x, int y, int z, int h, double u_x)` a následně uloženy do pole `Values[]`.

Posledním krokem algoritmu je zápis hodnot a souřadnic do souborů ve vhodném formátu pro vizualizaci ve vizualizačním nástroji. Konkrétně jsem použil datový formát `EnSightGold` [11], který umožňuje kompatibilitu se širokým spektrem vizualizačních nástrojů.

3 Numerický model

Numerické modelování zažívá v současné době veliký rozmach, jelikož výpočetní hardware se každým rokem stává výkonnějším. Dá se předpokládat, že tento vývoj bude pokračovat i do budoucna. Po celém světě rostou nová superpočítačová centra umožňující mj. velice složité numerické simulace, které nebyly dříve uskutečnitelné (pro mnohé pravděpodobně ani představitelné). Jednodušší numerické výpočty lze provádět i na běžných stolních PC případně na laptopech. Můžeme zkonstruovat vícerozměrné transportní modely proudění při rozlišení a takové úrovni detailu, které se např. před 10 lety zdály nedosažitelné.

Existuje taktéž řada vědeckých problémů, jejichž přesná analytická řešení neumíme zatím získat. Numerické modelování nabízí mnohdy dostatečně uspokojivé numerické řešení, díky kterému si lze o daném problému udělat poměrně přesný obrázek.

Tato kapitola se blíže zaměří na výpočetní dynamiku tekutin (CFD) a Navier-Stokesovy rovnice, které jsou základem pro téměř všechny CFD problémy. Dalším tématem je pak numerické modelování pomocí opensource souboru nástrojů OpenFOAM.

3.1 Výpočetní dynamika tekutin (CFD)

Následující kapitola popisuje výpočetní dynamiku tekutin, která se zabývá počítačovým simulováním proudění kapalin a plynů. Informace uvedené v této kapitole jsem čerpal ze článku věnovanému CFD na wikipedii [6] a z knihy o CFD [7]. Inženýři a matematici rozvinuli CFD před více než 40 lety, aby mohli řešit problémy související se šířením tepla a hmoty v aeronautice, aerodynamice vozidel, chemickém průmyslu a mnoha dalších odvětvích.

Základním aparátem popisujícím proudění tekutin jsou Navier-Stokesovy rovnice. Mají několik modifikací a ačkoli existují přes 150 let, lze je analyticky řešit pouze v několika málo případech jednoduchých toků viz např. kapitola 2.1. Při řešení složitějších případů se musí rovnice řešit numericky.

Přestože jsou tyto rovnice známy od začátku 19. století, jejich řešení vyžadovalo vývoj výkonných numerických technik řešení a bylo nutné zajistit možnost implementace těchto řešení na digitálních počítačích. Rozvoj počítačů během 50. a 60. let minulého století uspokojil tyto požadavky a CFD se tak stala jednou z prvních oblastí, která začala využívat nově rodící se oblast vědeckého computingu. Během tohoto procesu se brzy ukázalo, že CFD může být alternativou pro fyzikální modelování v mnoha oblastech dynamiky tekutin. CFD dále nabízí mnohem větší flexibilitu a nižší cenu.

Největších výzkumných pokroků pomocí CFD bylo dosaženo v aeronautice a oblasti průmyslového designu v důsledku značných investic do těchto oblastí. Dalším důvodem tohoto pokroku je také fakt, že okrajové podmínky úloh, geometrie, materiálové

vlastnosti a ostatní důležité skutečnosti jsou velice podrobně známy. V důsledku výše zmíněných faktů vzniká velice přesné řešení, které se dnes již hojně využívá místo laboratorních experimentů. Takto vyvinuté techniky dále slouží v oblastech, které souvisejí s životním prostředím, kde nejsme schopni definovat danou úlohu tak přesně.

Ve skutečnosti vede aplikace CFD na proudění v oblasti životního prostředí k celé řadě problémů, se kterými se v průmyslovém využití nesetkáme. Okrajové podmínky - například pole proudění vzduchu - jsou velice zřídka známy s takovou přesností jako třeba tvar křídla letadla nebo zrcátka automobilu. Navíc takové pole proudění vzduchu se v čase mění.

Dalším problémem je skutečnost, že přírodní objekty lze obtížně matematicky popsat. Mnohem obtížněji vytvoříme výpočetní síť nad sídlištěm či pahorkatým reliéfem než nad součástí automobilu, neboť analytický popis tvaru terénu je prakticky nerealizovatelný a navíc se terén mnohdy v čase mění. A samozřejmě, čím výpočetní síť lépe koresponduje se skutečností, tím přesnější výsledek CFD nabídne.

Můžou také nastat situace, kdy nejsme schopni do numerického modelu zahrnout veškeré aspekty ovlivňující modelovanou skutečnost, nebo se může stát, že nejsme schopni získat dostatečné množství přesných dat nutných pro výpočet (např. nemusíme mít pole proudění vzduchu v potřebné kvalitě ani k dispozici).

Výše uvedené problémy neznamenaají, že by CFD bylo pro modelování environmentálních dějů nepoužitelné. Je ovšem třeba mít tyto skutečnosti na paměti a počítat s nimi. Jako důsledek dostaneme sice méně přesné výsledky než při průmyslové aplikaci CFD, nicméně si troufám tvrdit, že i přesto je CFD jedním z nejsofistikovanějších a nejpresnějších nástrojů, které máme pro modelování environmentálních dějů momentálně k dispozici.

Navzdory všem výše uvedeným problémům se modelování dějů v životním prostředí stále rozvíjí. Nutnou podmínkou je samozřejmě zvyšování výkonu výpočetní techniky. Mnohem důležitějším faktorem ovlivňujícím tento rozvoj, je vývoj nástrojů používaných k topografickému průzkumu (např. GPS) které nám umožňují přesněji popsat a definovat okrajové podmínky či geometrii úloh.

Postup modelování pomocí CFD se skládá ze tří fází - preprocessingu, řešení a post-processingu.

Preprocessing je první fází. Obecně je jeho účelem příprava modelu. Zahrnuje vytvoření sítě, ve které se bude následně modelovat. Ta se skládá z různých geometrických útvarů. Ve 2D se většinou používají mnohoúhelníky, nejčastěji trojúhelníky. Ve 3D se pak využívají především čtyřstěny, kvádry nebo jehlany. V případě modelování znečištění ovzduší jde o popis reliéfu a prostoru pro modelování. Dále definuje okrajové podmínky, vstupní hodnoty veličin, časovou závislost a další potřebné souvislosti. Preprocessing

lze provádět grafickou cestou pomocí softwaru, případně je možné si výpočetní oblast naprogramovat svépomocí.

Druhou fází je **řešič**. Řešič řeší danou úlohu na základě vstupních dat připravených z preprocessingu a vypočítává výsledky, které dále zpracuje do formátu vhodného pro postprocessing. Řešiče se obvykle dají různě modifikovat. Konkrétně při modelování znečištění ovzduší se většinou dá nastavit typ proudění (turbulentní/laminární), drsnost povrchu, viskozita vzduchu a další parametry.

Třetí a poslední fáze se nazývá **postprocessing**. Jejím cílem je co nejlépe zobrazit výsledky vypočtené solverem. Ty mohou mít podobou čísel či grafů. V případě modelování znečištění ovzduší jsou nejčastěji výsledky prezentovány pomocí obrázků a v případě výpočtu závislého na čase se využívají animace. Správná interpretace výsledků je velmi důležitá, proto postprocessingové nástroje nabízejí široké možnosti, vizualizace výstupu. Lze zobrazit všechny veličiny vyskytující se ve výpočtu nebo například pole proudění vzduchu.

3.2 Navier-Stokesovy rovnice

Navier-Stokesovy rovnice jsou nelineární parciální diferenciální rovnice, které popisují proudění tekutin. Vycházejí ze zákonů zachování hybnosti, hmotnosti a energie. Navier-Stokesovy rovnice lze zapsat mnoha způsoby v závislosti na předpokládaných skutečnostech. Obecné předpoklady (popsány v [13]), umožňující popsat proudící tekutinu pomocí Navier-Stokesových rovnic [9], jsou

- tekutina je spojitě prostředí s prostorově i časově konstantní hustotou
- tekutina je izotropní a newtonovská ⁵
- rychlost, tlak i specifická objemová síla ⁶ jsou hladké funkce

Dále předpokládáme konstantní viskozitu a nestlačitelnost tekutiny (v případě atmosféry tento předpoklad neznamena výraznější chybu). Nestlačitelnost tekutiny se vyjádří jako

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (12)$$

kde \mathbf{v} je rychlost proudění. V důsledku toho, že je tekutina nestlačitelná, se vyloučí mj. možnost šíření zvuku a rázových vln jejím nitrem, což zde nepředstavuje vážnější omezení. Za těchto předpokladů dostaneme následující tvar Navier-Stokesovy rovnice, jehož odvození můžeme nalézt v [12]

⁵Newtonovská tekutina je taková, ve které tenzor napětí lineárně závisí na tenzoru rychlosti deformace (to přibližně znamená, že smyková napětí jsou úměrná rychlostnímu spádu). Pro bližší vysvětlení viz [13] a [15]

⁶(anglicky body force [14]), která působí na celý objem tělesa (v našem případě část tekutiny). Příkladem objemových sil mohou být elektromagnetické síly nebo např. gravitace.

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} \quad (13)$$

kde \mathbf{v} je rychlost proudění, t je čas, ρ je hustota kapaliny, p je tlak, μ je dynamická viskozita, \mathbf{f} reprezentuje tzv. objemové síly.

Význam jednotlivých členů rovnice je následující:

$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ - lokální zrychlení,

$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$ - konvektivní zrychlení,

∇p - zrychlení způsobeného tlakovým gradientem,

$\mu \nabla^2 \mathbf{v}$ - zrychlení, které je potřeba k překonání vnitřního tření (viskozity),

\mathbf{f} - zrychlení způsobené objemovými silami.

Navier-Stokesova rovnice v této podobě úzce souvisí s konvekčně-difúzní rovnicí, jak podrobněji popisuje [16]. Zjednodušeně řečeno je hlavní rozdíl v tom, že Navier-Stokesova rovnice popisuje přesun vektorové veličiny uvnitř tekutiny, kdežto konvekčně-difúzní rovnice popisuje přenos skalární veličiny (např. tepla, hmoty, znečištění). Z konvekčně-difúzní rovnice pak vychází ScalarTransportFoam řešič OpenFOAMu viz kapitola 3.3.1.

Navier-Stokesovy rovnice zároveň patří mezi tzv. „problémy tisíciletí“ [8] nebo také otevřené matematické problémy, za jejichž vyřešení se vyplácí odměna ve výši milionu amerických dolarů. Konkrétně ohledně Navier-Stokesových rovnic stále není dokázáno, zda existuje řešení těchto rovnic ve 3D se zadanými počátečními podmínkami. Podrobněji se tímto problémem zabývá [12], stručnější přehled je pak možné nalézt v [13]. Zdárný důkaz této hypotézy by potvrdil, že Navier-Stokesovy rovnice jsou velmi dobrým matematickým modelem proudění vazké nestlačitelné tekutiny a přispěl by například k lepšímu porozumění turbulencím.

3.3 OpenFOAM

OpenFOAM® (Open Field Operation and Manipulation) je open source softwarový balík pro CFD výpočty. V OpenFOAMu se programuje pomocí jazyka C++, který má vhodně rozšířenou syntaxi např. pro účely zápisu matematických rovnic. OpenFOAM má rozsáhlou uživatelskou základnu napříč mnoha vědeckými a průmyslovými oblastmi. OpenFOAM nabízí řešiče pro širokou škálu problémů, od složitého proudění tekutin, které zahrnuje chemické reakce, turbulence či transport tepla uvnitř toku, až po dynamiku tuhých těles nebo elektromagnetismus.

Téměř vše včetně vytváření výpočetních sítí, pre- i post-processingu lze standardně spustit v paralelním výpočetním prostředí, což umožňuje uživateli naplno využít potenciál dostupného hardwaru. OpenFOAM běží pouze na unixových systémech.

Preprocessing

OpenFOAM má vlastní nástroje pro tvorbu výpočetních sítí. Tyto nástroje umožňují vytvořit poměrně komplexní sítě. Můžeme definovat například počet, hustotu i tvar buněk v síti. Buňky mohou nabývat rozličných tvarů o libovolném počtu stěn i hran.

Prvním z nástrojů pro generování výpočetních sítí je blockMesh. Používá se především pro jednodušší (méně členité) geometrie jako například válce či krychle.

Pro komplexnější geometrie je určen snappyHexMesh, který vytváří síť z STL[26] souborů. Ty můžeme vytvořit ručně nebo např. s pomocí CAD softwaru. Máme-li tedy kupříkladu STL soubor s nadefinovaným reliéfem obsahujícím budovy či hornatý terén, snappyHexMesh dokáže i kolem takto členitého reliéfu vytvořit výpočetní síť. SnappyHexMesh lze spouštět i paralelně. OpenFOAM taktéž disponuje nástroji pro konverzi výpočetních sítí a manipulaci s nimi. Seznam těchto nástrojů se nachází v [23] a [22]

Řešiče

OpenFOAM obsahuje přes 80 numerických modelů a algoritmů pro řešení problémů z inženýrské praxe, jejich seznam a popis je možné naleznout zde [24]. Díky tomu, že je OpenFOAM open source, můžeme vytvářet vlastní solvery, případně modifikovat stávající. Syntaxe OpenFOAMu umožňuje poměrně pohodlně vyjádřit řešené rovnice. Například níže uvedená rovnice

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U} \mathbf{U} - \nabla \cdot \mu \nabla \mathbf{U} = -\nabla p \quad (14)$$

je reprezentována následujícím kódem:

```
solve
(
    fvm::ddt(rho, U)
  + fvm::div(phi, U)
  - fvm::laplacian(mu, U)
  ==
  - fvc::grad(p)
);
```

Výpis 5: Zdrojový kód řešiče reprezentující rovnici (14)

Vidíme, že syntaxe je velice srozumitelná i pro člověka, který neprogramuje v C++.

Postprocessing

Pro vizualizaci výsledků se dá využít široké spektrum vizualizačních nástrojů. Přímou s OpenFOAMem je nabízena instalace ParaView [21], ve kterém lze okamžitě po výpočtu

vizualizovat výsledky pomocí příkazu `paraFoam`. Data z OpenFOAMu se dají zobrazit také v celé řadě jiných nástrojů. Pokud nástroj pro postprocessing nepodporuje přímo formát OpenFOAMu, nabízí vývojáři tohoto produktu i nástroje pro konverzi dat do jiných běžně používaných formátů.

Závěrem si ještě shrňme výhody a nevýhody OpenFOAMu, jak jsou u vedeny v [20]. Mezi výhody jednoznačně patří

- programátorsky přívětivá syntaxe pro implementaci parciálních diferenciálních rovnic,
- existence nástroje pro vytváření výpočetních sítí,
- automatická paralelizace bez nutnosti měnit ručně zdrojový kód,
- absence licenčních poplatků.

Za nevýhody pak lze považovat

- absenci integrovaného GUI,
- nedostatek ukázkových příkladů pro samostudium.

3.3.1 Implementace, `ScalarTransportFoam`

V následující podkapitole přiblížím solver `scalarTransportFoam`, při popisu se budu inspirovat [25]. `ScalarTransportFoam` je základní solver, který řeší transportní rovnici pro pasivní skalár za použití stacionárního pole rychlostí. Typicky se používá pro řešení konvekčně-difúzní rovnice nad stacionárním polem rychlostí, které je na vstupu. Toto pole si nechám napočítat pomocí solveru `simpleFoam`.

Pasivním skalárem rozumíme v našem případě přenášené znečištění v ovzduší. Může jím být například i teplo nebo jiná rozumně modelovatelná skalární veličina.

`ScalarTransportFoam` solver požívá kompletní konvekčně-difúzní rovnici v nestlačitelném stavu,

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}T) - \nabla^2 (D_T T) = 0 \quad (15)$$

kde T znamená přenášenou skalární veličinu, \mathbf{U} reprezentuje rychlost tekutiny, D_T je difúzní koeficient (konstanta), t je čas.

Numerické řešení pomocí `scalarTransportFoam` je založeno na metodě konečných objemů. Ta podobně jako jiné numerické metody (např. metoda konečných prvků, metoda konečných diferencí) počítá přibližné hodnoty na diskretizační síti. Konkrétně u metody konečných objemů spočívá hlavní myšlenka v rozdělení výpočtové sítě na konečný počet tzv. kontrolních objemů, ve kterých se spočítají dané aproximace.

Kontrolním objemem rozumíme malé okolí každého uzlu sítě. Pro nás, jako uživatele, je tento popis metody konečných objemů dostačující a znamená především to, že výpočet je velice náchylný na kvalitu vytvořené výpočetní sítě. Jinými slovy, čím jemnější a přesnější síť máme, tím rychleji metoda konverguje a tím přesnější výsledky dostaneme. Důkladnější popis metody konečných objemů lze nalézt v [17], [18], [19].

Základní schéma výpočtu numerického modelu pro modelový příklad v kapitole 4.1 pomocí OpenFOAMu je následující

- nejprve se vytvoří „obrysová“ výpočetní síť pomocí nástroje blockMesh, ve které se specifikují jednotlivé okrajové podmínky a rozměry,
- poté se tato „obrysová“ síť upraví pomocí nástroje snappyHexMesh, tím se do ní zakomponuje terén,
- dále se řešičem simpleFoam vypočítá pole rychlostí uvnitř sítě,
- pole rychlostí získané jako výstup simpleFoamu se použije na vstupu solveru scalarTransportFoam, který spočítá koncentrace znečištění.

4 Numerické experimenty

Tato kapitola ve své první části srovnává numerický model, který je implementován v OpenFOAMu, se Suttonovým modelem. Druhá část kapitoly pak porovnává paralelní a sekvenční implementaci Suttonova modelu.

4.1 Porovnání analytického a numerického modelu

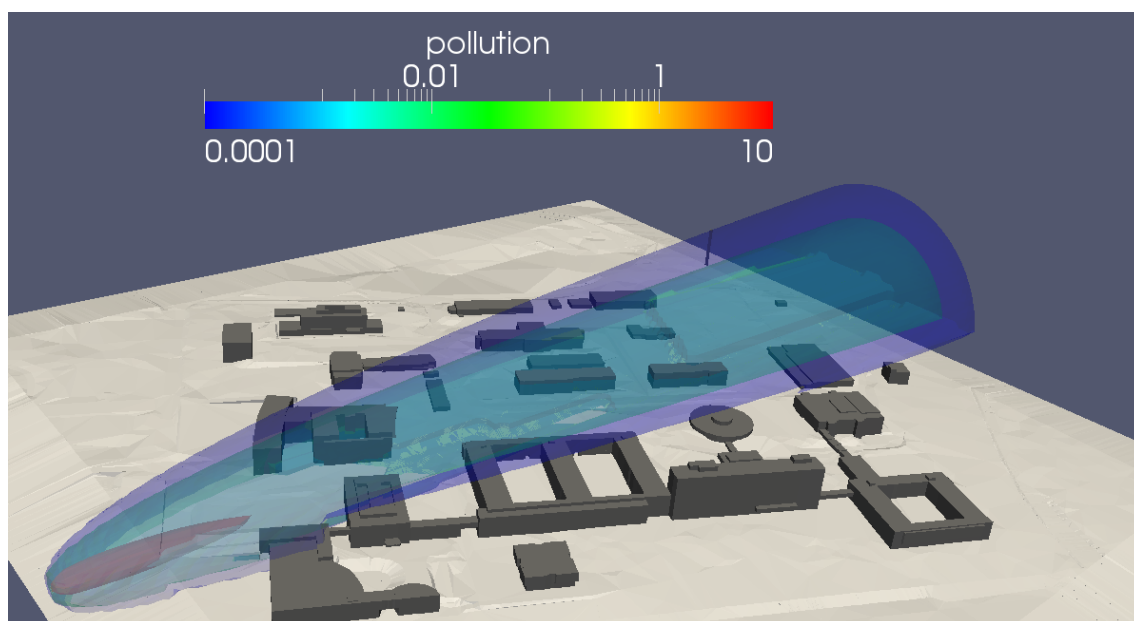
Následující kapitola srovnává analytický a numerický model z několika pohledů. Pro porovnání jsem vytvořil modelovou úlohu nad areálem VŠB-TUO, ve které je na jižní straně areálu umístěn zdroj emitující znečištění. Konkrétně si pod takovýmto zdrojem můžeme představit například požár. Dále předpokládáme konstantní vítr o rychlosti 2 ms^{-1} , který má severní směr (na areál VŠB-TUO).

Z hlediska modifikovatelnosti je více flexibilní numerický model. Umožňuje nastavit množství okrajových podmínek a dalších několik desítek vstupních parametrů, které ovlivňují například turbulenci, jemnost a tvar výpočetní sítě a další vlastnosti výpočtu. Oproti tomu analytický model přijímá pouze rychlost větru, turbulentní koeficient, množství znečištění emitované zdrojem, jeho výšku a souřadnice uzlu, ve kterém je počítáno znečištění. Do analytického modelu nevstupuje žádný čas, jelikož předpokládá ustálený stav znečištění v době $t \rightarrow \infty$ (jak bylo zmíněno v kapitole 2.1) a proto je tento model statický. Naproti tomu numerický model s časem počítá a umožňuje tak modelovat i dynamicky se měnící případy v rozmezí několika sekund.

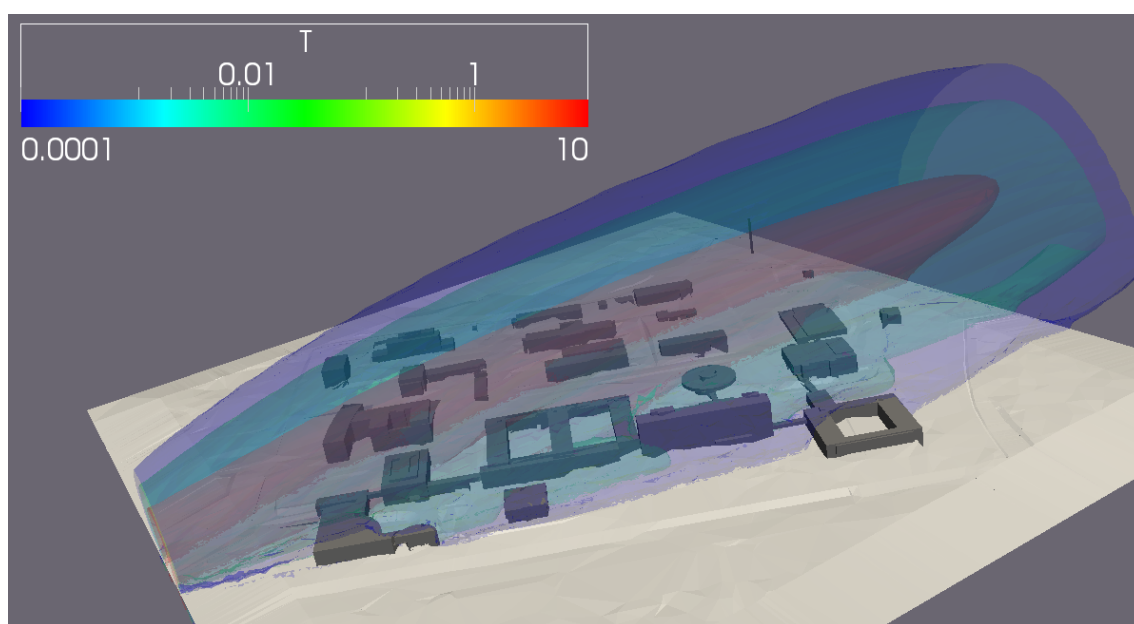
Jak je možné vidět na obrázcích 6 a 8, numerický model také pracuje s úplným reliéfem terénu oproti analytickému modelu na obrázku 5 a 7, který uvažuje pouze vertikální změny terénu, projevující se v praxi tak, že kouřová vlečka za kopci již například nepadá zpět do údolí apod. Jednotky na všech obrázcích jsou uvedeny v 10^{-3} g.m^{-3} .

S výše uvedenými skutečnostmi samozřejmě úzce souvisí výpočetní a časová náročnost jednotlivých modelů. Zatímco k výpočtu výsledků analytického modelu bez problému postačí stolní PC nebo běžný notebook, pro numerický model jsem na notebooku s dvoujádrovým procesorem a 4GB RAM nebyl schopen vytvořit ani výpočetní síť, jelikož se jedná o paměťově relativně náročnou operaci. Pro generování sítě a samotný výpočet numerického modelu jsem použil výpočetní cluster Teri superpočítačového centra VŠB-TUO a floreon-smp katedry aplikované matematiky VŠB-TUO. Na florenu-smp, který má 252 GB RAM a 48CPU jsem vytvořil výpočetní síť, nad kterou jsem poté spustil numerický model na clusteru Teri, který obsahuje 16 uzlů. Na každém uzlu jsou 2 CPU o 4 jádrech. Výsledky analytického modelu jsem získal za několik desítek sekund na notebooku, kdežto kompletní výpočet numerického modelu včetně vygenerování sítě trval několik hodin a probíhal paralelně na 8 jádrech jednoho uzlu clusteru Teri.

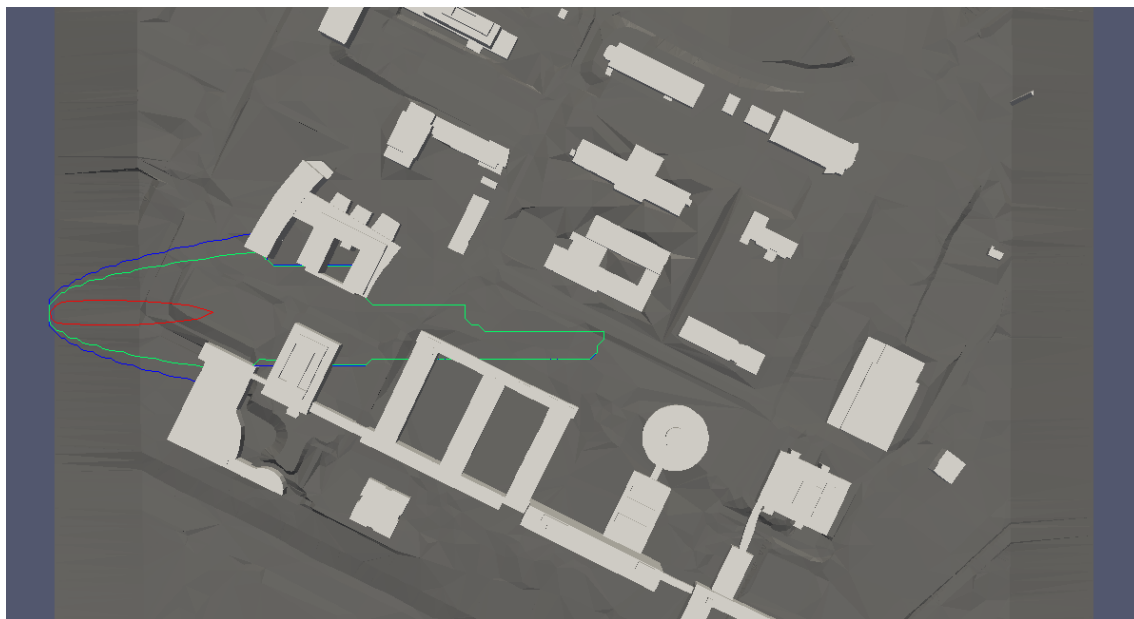
Oba modely umožňují paralelní spouštění. U numerického modelu v OpenFOAMu lze vybrat z několika způsobů, jak rozdělit síť pro paralelní výpočet. Počet CPU je také volitelný. Podrobnější info je možné nalézt na stránkách [2]. O paralelní implementaci analytického modelu pak pojednává kapitola 2.4.



Obrázek 5: Výsledky úlohy vypočítané analytickým modelem



Obrázek 6: Výsledky úlohy vypočítané numerickým modelem



Obrázek 7: Výsledky úlohy vypočítané analytickým modelem - horizontální řez 20m nad zemí



Obrázek 8: Výsledky úlohy vypočítané numerickým modelem - řez 20m nad zemí

Znečištění na obou obrázcích je uvedeno v $10^{-3}g.m^{-3}$. Další grafické výstupy jsou umístěny v přílohách A a B.

4.2 Porovnání sekvenční a paralelní implementace Suttonova modelu

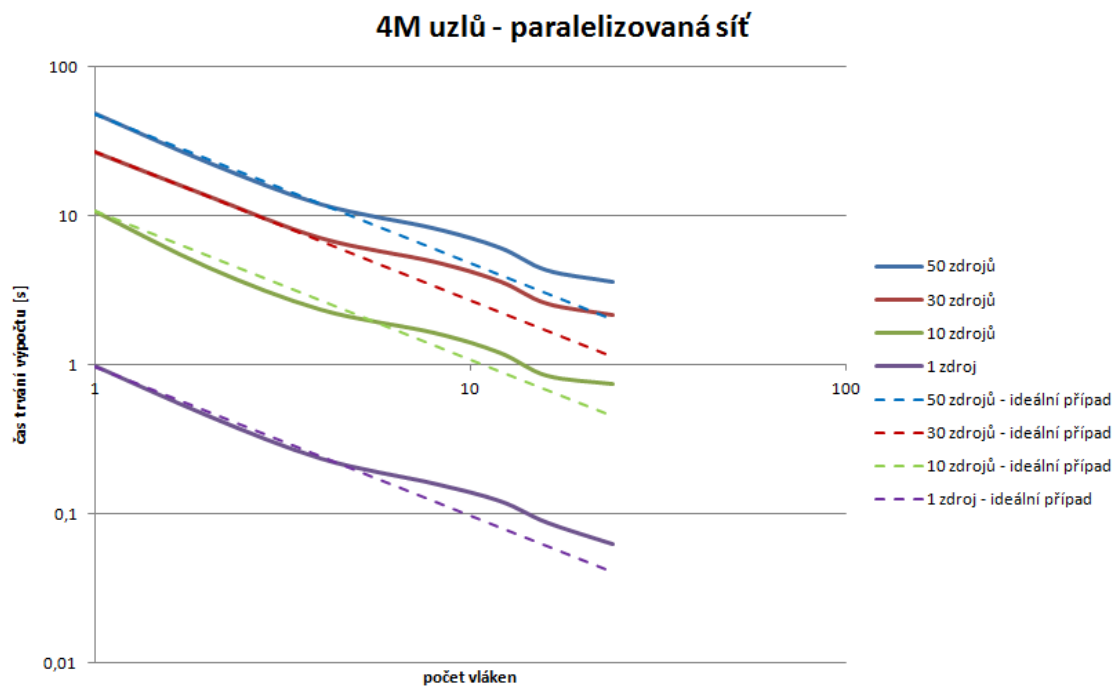
Následující část se bude zabývat srovnáním paralelní a sekvenční implementaci Suttonova modelu na síti o velikosti 4 000 000 uzlů s proměnným počtem zdrojů v síti. Obecně se dá předpokládat, že čím více zdrojů bude v síti umístěno, tím déle výpočet potrvá. Naopak s přibývajícím počtem použitých procesorů by se měla doba výpočtu přímo úměrně zkracovat. Tomuto jevu říkáme silná paralelní škálovatelnost. To samozřejmě nemusí platit vždy, jelikož mezi procesory probíhá komunikace, která také ovlivňuje dobu trvání výpočtu. Z tohoto důvodu nemusí pokaždé paralelizace přinést kýžený efekt.

Jak je zmíněno v kapitole 2.4, výpočet lze efektivně paralelizovat na 2 místech. Jednak lze rozdělit výpočty v různých částech sítě do různých vláken, anebo můžeme počítat v různých vláknech znečištění pocházející od různých zdrojů. Tyto 2 možnosti paralelizace v této kapitole porovnáme.

Všechny dále uvedené experimenty byly provedeny na serveru srva10t.vsb.cz za využití 1 až 24 vláken. Do sítě jsem postupně umístil 1, 10, 30 a 50 zdrojů. Výsledné časy jsem získal jako průměr pěti naměřených hodnot, jelikož rychlost výpočtu se může měnit v závislosti na aktuálním vytížení procesoru. Naměřená data jsou uvedena v tabulkách 1, 2 a grafech (obrázky 9, 10).

počet vláken	čas [s]			
	1 zdroj	10 zdrojů	30 zdrojů	50 zdrojů
1	0.9734	10.7484	26,9694	48,3822
2	0,4524	4.5178	13,6390	22,6826
4	0.2340	2.3432	7,0888	11,8870
8	0.1592	1,6380	4,9110	8,1740
12	0.1216	1,2014	3,6192	6,068
16	0.0874	0,8424	2,5648	4,2900
24	0.0626	0,7394	2,1434	3,5818

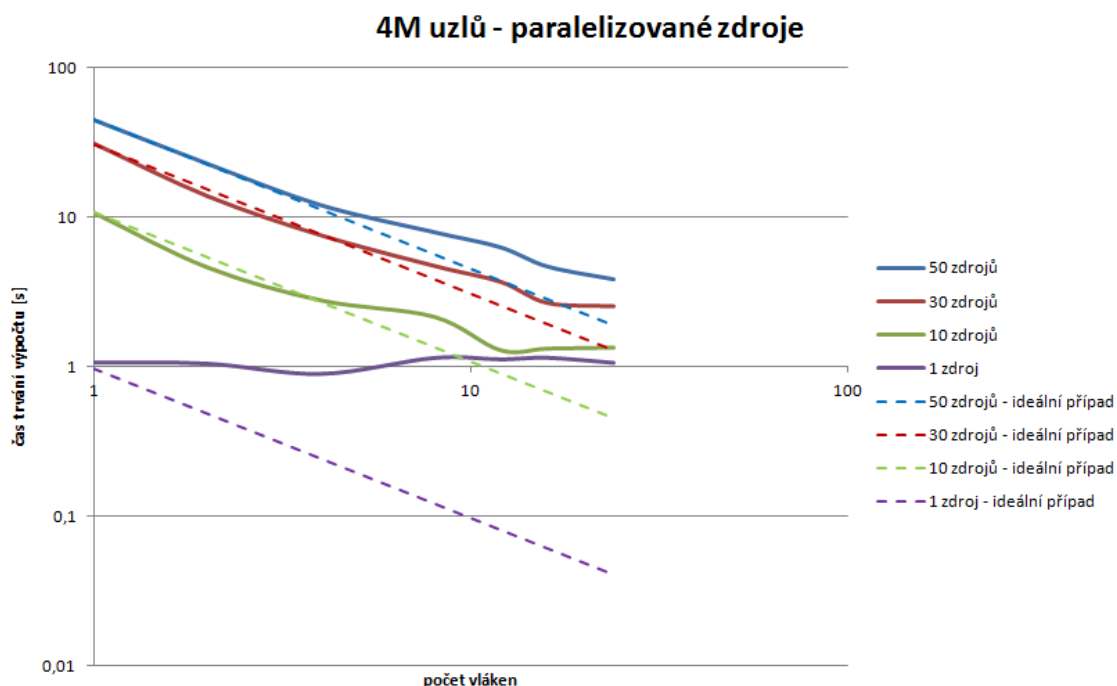
Tabulka 1: Naměřené hodnoty pro paralelizovanou síť se 4 000 000 uzly



Obrázek 9: Časy výpočtů na síti se 4 000 000 uzlů - paralelizovaná síť

počet vláken	čas [s]			
	1 zdroj	10 zdrojů	30 zdrojů	50 zdrojů
1	1,0704	18,9010	30,8506	45,0998
2	1,0484	8,9232	13,7748	22,9728
4	0,8924	4,7238	7,5536	12,1274
8	1,1480	3,3384	4,7236	7,9874
12	1,1232	2,5890	3,7002	6,3212
16	1,1502	2,2590	2,6708	4,6926
24	1,0636	1,3480	2,5364	3,8500

Tabulka 2: Naměřené hodnoty pro paralelizované zdroje se 4 000 000 uzly



Obrázek 10: časy trvání výpočtů na síti se 4 000 000 uzlů - paralelizované zdroje

Na grafech (obrázky 9 a 10) vidíme jak klesá doba výpočtu s rostoucím počtem zapojených vláken do výpočtu. Čárkovaně je naznačeno škálování v ideálním případě. Vidíme, že rozdíl mezi oběma výpočty je v tomto případě minimální. OpenMP rozděljuje práci mezi vlákna stejným způsobem, takže se výsledné časy příliš neliší. Aby se jednotlivé výpočty lišily, bylo by nutné paralelizovat síť a zdroje programátorsky (např. prostřednictvím MPI [27]) nikoliv automaticky pomocí OpenMP.

5 Závěr

Cílem této práce bylo analyzovat a následně porovnat matematické modely, využívané pro modelování znečištění ovzduší. Konkrétně jsem se v práci zaměřil na model analytický a numerický. Analytický model jsem implementoval pomocí C++. K řešení dané problematiky pomocí numerického modelu jsem využil OpenFOAM. Výsledky obou modelů se následně porovnály z několika úhlů pohledu na modelové úloze. K úspěšnému dosažení tohoto cíle bylo nejprve nutné pochopit, jak oba modely fungují, abych je následně mohl implementovat a testovat.

Dále jsou v práci porovnány 2 možnosti paralelizace analytického (Suttonova) modelu z hlediska časového zrychlení a škálovatelnosti na modelové úloze. Implementaci v C++ jsem paralelizoval pomocí OpenMP.

Do budoucna je možné analytický model upravit a přizpůsobit pro nasazení v systému FLOREON+ pro monitorování, modelování, predikci a podporu řešení krizových situací.

Osobně jsem se díky této práci seznámil s problematikou modelování znečištění ovzduší. Dále jsem do budoucna získal mnoho užitečných zkušeností s matematickým modelováním, výpočetní dynamikou tekutin (CFD). V neposlední řadě jsem se pak naučil pracovat s opensourcovým CFD nástrojem OpenFOAM a několika vizualizačními nástroji, což v budoucnu zajisté mnohokrát využiji.

6 Reference

- [1] BUBNÍK, Jiří. *Symos '97: systém modelování stacionárních zdrojů : metodická příručka pro výpočet znečištění ovzduší z bodových, plošných a liniových zdrojů* [online]. 1. vyd. Praha: Český hydrometeorologický ústav, 1998, 67 s. [cit. 2013-03-06]. ISBN 80-858-1355-6. Dostupné z: http://knc.czu.cz/~vachm/ovzdusi/ovzd_zak/symos_A4.pdf
- [2] The OpenFOAM® Foundation. [online]. [cit. 2013-03-05]. Dostupné z: www.openfoam.org
- [3] VACH, Marek. *Ochrana ovzduší* [online]. 2010 [cit. 2013-03-06]. Dostupné z: http://knc.czu.cz/~vachm/ovzdusi/ovzd_text.doc. Česká zemědělská univerzita v Praze
- [4] JANCÍK, Petr a Marek LESÁK. *Modely v regionálním měřítku*. In: [online]. [cit. 2013-03-06]. Dostupné z: http://gis.vsb.cz/gisengl/Publications/GIS_Ova/2003/Referaty/lesak.htm
- [5] Atmosférická depozice - Enviwiki. [online]. [cit. 2013-03-10]. Dostupné z: http://www.enviwiki.cz/wiki/Atmosferická_depozice
- [6] Computational fluid dynamics - Wikipedia, the free encyclopedia [online]. [cit. 2013-04-04]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Computational_fluid_dynamics
- [7] EDS.: PAUL D. BATES, Eds.: Paul D.Stuart N. Computational fluid dynamics applications in environmental hydraulics. Chichester: J. Wiley, 2005. ISBN 978-047-0015-193.
- [8] Millennium Prize Problems - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-09]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Millennium_Prize_Problems
- [9] Navier–Stokes equations - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-09]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Navier\IL2\textendashStokes_equations
- [10] FLOREON. [online]. [cit. 2013-04-09]. Dostupné z: www.floreonplus.eu
- [11] EnSight's Gold Casefile Format - Visualization. [online]. [cit. 2013-04-09]. Dostupné z: http://www.visualization.hpc.mil/wiki/EnSight's_Gold_Casefile_Format
- [12] DOERING, Charles R. Applied Analysis of the Navier-Stokes Equations. 1. vyd. Cambridge: Cambridge University Press, 1995, 217 s. ISBN 05-214-4568-X.

-
- [13] NEUSTUPA, Jiří. Navierovy-Stokesovy rovnice: regularita nebo „blow-up“?. Pokroky matematiky, fyziky a astronomie [online]. Praha: Jednota českých matematiků a fyziků, 2006, Vol. 51 [cit. 2013-04-12]. ISSN 0032-2423. Dostupné z: <http://dml.cz/dmlcz/141317>
- [14] Body force - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-12]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Body_force
- [15] Newtonian fluid - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-12]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Newtonian_fluid
- [16] Convection–diffusion equation - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-12]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Convection-diffusion_equation
- [17] Finite-volume method - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-14]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Finite-volume_method
- [18] VERSTEEG, H. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. 2nd ed. Harlow: Pearson Prentice Hall, 2007, xii, 503 s. ISBN 978-0-13-127498-3.
- [19] FUKA, Vladimír. Modelování proudění ve vysokém rozlišení. Praha, 2006. Diplomová práce. Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra meteorologie a ochrany prostředí. Vedoucí práce doc. RNDr. Josef Brechler, CSc.
- [20] OpenFOAM - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-14]. Dostupné z: <http://en.wikipedia.org/wiki/OpenFOAM>
- [21] ParaView - Open Source Scientific Visualization. [online]. [cit. 2013-04-14]. Dostupné z: <http://www.paraview.org/>
- [22] Mesh Manipulation. [online]. [cit. 2013-04-14]. Dostupné z: <http://www.openfoam.com/features/mesh-manipulation.php>
- [23] Mesh Conversion. [online]. [cit. 2013-04-14]. Dostupné z: <http://www.openfoam.com/features/mesh-conversion.php>
- [24] Standard Solvers. [online]. [cit. 2013-04-14]. Dostupné z: <http://www.openfoam.com/features/standard-solvers.php>
- [25] ScalarTransportFoam - OpenFOAMWiki. [online]. [cit. 2013-04-14]. Dostupné z: <http://openfoamwiki.net/index.php/ScalarTransportFoam>
- [26] STL (file format) - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2013-04-28]. Dostupné z: [http://en.wikipedia.org/wiki/STL_\(file_format\)](http://en.wikipedia.org/wiki/STL_(file_format))
- [27] Message Passing Interface – Wikipedie. [online]. [cit. 2013-04-30]. Dostupné z: http://cs.wikipedia.org/wiki/Message_Passing_Interface

A Numerický model - obrázky a animace

Další obrázky a animace výsledků z numerického modelu jsou umístěny na příloženém CD ve složce „numericky_model“.

B Analytický model - obrázky

Další obrázky výsledků z analytického modelu jsou umístěny na přiloženém CD ve složce „analyticky_model“.